



普通高等教育“十三五”规划教材

计算物理的 MATLAB 解法与可视化

唐炼 赵昆 主编

中国石化出版社

[HTTP://WWW.SINOPEC-PRESS.COM](http://www.sinopec-press.com)

普通高等教育“十三五”规划教材

计算物理的 MATLAB 解法与可视化

唐 炼 赵 昆 主编



中国石化出版社

内 容 提 要

本书从计算物理学包含的物理问题的数值计算和数值模拟两个方面出发,介绍了线性方程组的数值解法,实验数据的插值和拟合,并在此基础上,主要讲述了有限差分法和有限元素法的数值求解方法。所有的计算过程,全部采用 MATLAB 语言进行编程计算,给出了源程序,并利用 MATLAB 软件所提供的图形技术,将部分计算结果用图形表现出来,使一些抽象、难懂的内容变得生动形象,加深了学生对相关概念和理论的理解和掌握,提高了计算机编程和应用的能力。

本书适合于作为石油高等院校物理专业的研究生和物理类高年级本科生教材。对于其他相近专业的科技工作者也具有一定的参考价值。

图书在版编目(CIP)数据

计算物理的 MATLAB 解法与可视化 / 唐炼, 赵昆主编.
—北京: 中国石化出版社, 2016. 2
ISBN 978-7-5114-3830-0

I. ①计… II. ①唐… ②赵… III. ①Matlab 软件-应用-物理学-数值计算-计算方法-高等学校-教材
IV. ①O411

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 023912 号

未经本社书面授权,本书任何部分不得被复制、抄袭,或者以任何形式或任何方式传播。版权所有,侵权必究。

中国石化出版社出版发行

地址:北京市东城区安定门外大街 58 号

邮编:100011 电话:(010)84271850

读者服务部电话:(010)84289974

<http://www.sinopec-press.com>

E-mail:press@sinopec.com

北京富泰印刷有限责任公司印刷

全国各地新华书店经销

*

787×1092 毫米 16 开本 9.75 印张 224 千字

2016 年 3 月第 1 版 2016 年 3 月第 1 次印刷

定价:30.00 元

前 言

计算物理学是以计算机及计算机技术为工具和手段,运用计算数学的方法,解决复杂物理问题的一门应用科学。它是一门新兴的边缘科学,随着计算机的出现和发展而逐步形成的物理学的一个分支,是物理学、数学、计算机科学三者相结合的产物。

计算物理借助于计算机进行计算与研究。它涉及建立模型、选择计算方法、用语言编程以及结果分析。这个系统过程缺一不可,只有掌握了这四个方面的技能,才能独立地完成任务。而在这四个方面中,利用计算机语言编程计算是大多数学生学习该课程时遇到的主要问题。本书利用目前应用较广的 MATLAB 作为编程语言,因为它具有“入门就能用”的特点,同时还具有强大的计算功能和可视化的仿真环境,可解决学生编程难的问题,又可利用它所提供的图形技术,将计算物理枯燥乏味公式中的物理图像展现出来,使一些抽象、难懂的内容变得生动形象,从而提高学生的学习兴趣,显著改善教学效果。

考虑到研究生的基础和特点,在本书中,首先对 MATLAB 语言进行了简单介绍,并在此基础上,介绍了线性方程组的数值解法及实验数据的插值和拟合,所有的计算过程全部用 MATLAB 编程进行计算,并且给出所有的计算源程序,使学生在较短时间内熟悉 MATLAB 编程的基本方法;然后详细介绍了有限差分和有限元两种常用数值法的基本原理、网格划分、数据离散、方程求解和实际应用,整个计算过程全部用 MATLAB 编程进行,实现了用计算机完全取代手工计算,为学生今后从事有关的数值计算工作打下良好的基础。

本书由唐炼、赵昆主编,第一章、第二章由赵昆编写,第三章~第五章由唐炼编写。在本书的编写过程中,得到了中国石油大学理学院物理系各位老师的支持和帮助,在此表示衷心的感谢。限于编者的水平和能力,书中难免存在缺点和错误,敬请读者批评指正。

目 录

第一章 MATLAB 简介	(1)
第一节 MATLAB 的窗口	(1)
第二节 MATLAB 的基本语法	(3)
第三节 MATLAB 程序设计	(7)
第四节 MATLAB 绘图	(13)
第五节 MATLAB 符号运算	(20)
第六节 利用 MATLAB 模拟物理图形和图像	(25)
习题	(28)
第二章 线性方程组的数值解法	(30)
第一节 解线性方程组的直接法	(30)
第二节 三角分解法	(39)
第三节 线性方程组的迭代法	(46)
习题	(55)
第三章 实验物理学中的插值和数据拟合	(56)
第一节 插值法	(56)
第二节 曲线拟合	(64)
习题	(72)
第四章 有限差分法	(74)
第一节 差分运算的基本概念	(74)
第二节 矩形域中的拉普拉斯方程和泊松方程的差分格式	(77)
第三节 圆形域中拉普拉斯方程和泊松方程的差分格式	(96)
第四节 轴对称场中拉普拉斯方程和泊松方程的差分格式	(98)
习题	(101)
第五章 有限元素法	(102)
第一节 泛函与变分法	(102)

第二节 二维有限元分析	(115)
第三节 有限元素的自动剖分	(136)
第四节 有限元方程的求解	(139)
第五节 MATLAB 工具箱在有限元中的应用	(142)
习题	(148)
参考文献	(149)

第一章 MATLAB 简介

MALAB 是 MathWorks 公司于 1982 年推出的一套高性能数值计算的可视化软件, 它集数值分析、矩阵计算、信号处理和图形显示于一体, 构成一个使用方便、界面友好的用户环境。在这种环境下, 用户只需要简单地列出数学表达式, 结果便以数值或图形的方式显示在计算机屏幕上, 用户也可以将结果保存在文件中。

MALAB 的名称源自 Matrix Laboratory, 是一门计算语言。MALAB 将计算与可视化集成到一个灵活的计算机环境中, 并提供了大量的内置函数, 可以在广泛的工程问题中直接调用这些函数获得数值解。MALAB 有许多工具箱, 这些工具箱成为一些领域的实用工具。MALAB 具有如下特点:

1. 易学习性

MALAB 语言不要求用户有较高深的数学和程序语言知识, 不需要用户深刻了解算法及编程技巧。用户只需输入求解问题的数学表达式, 就能得到计算结果。MALAB 既是一种编程环境, 又是一种程序设计语言。这种语言同高级程序语言(如 C、Fortran)一样, 有其特定的语法规则, 但它的规则更接近于数学表示, 因而使用起来更为方便。

2. 实用方便性

MALAB 包含了被称作 Toolbox(工具箱)的各类问题求解工具, 它实际上是对 MALAB 进行扩展应用的一系列 MALAB 函数(称作 M 文件)。利用工具箱可以解特定学科的问题, 如线性规划、信号处理、小波分析等。

3. 易扩展性

MALAB 允许用户建立指定功能的 M 文件, 从而可以产生特定功能的工具箱。用户不仅可以使 MALAB 提供的函数及基本工具箱函数, 而且可以方便地编写出专用函数, 因此大大扩展了 MALAB 的应用范围。

4. 先进的可视化工具

MALAB 提供了强大的、交互式的二维和三维绘图功能, 可使用户创建富有表现力的彩色图形。

第一节 MATLAB 的窗口

一、启动与退出

在 Windows 平台启动 MATLAB(以 7.0 版为例)可以选择“开始→程序→MATLAB7.0→

MATLAB 7.0”命令或双击在安装时在操作系统桌面创建的快捷方式。启动后会出现如图 1-1 所示的桌面，桌面上包含一些 MATLAB 工具。MATLAB 是一种指令式语言，用户可以通过界面、指令改变初始化设置。退出 MATLAB 只需单击“关闭”按钮，也可以在命令窗键入 quit 或 exit。



图 1-1 MATLAB 桌面

二、命令窗口(Command Window)的使用

在 MATLAB 的命令窗口直接输入命令，再按[Enter]键则运行并显示相应的结果。直接在 Command Window 上输入 $2 * 3$ ，则按下[Enter]键会得出计算结果。程序设计及运行结果如图 1-2 所示。



图 1-2 程序设计及运行结果

程序说明：

(1) 在窗口中，“>>”是 MATLAB 的提示符号。

(2) 在程序中，“%”后的语句为注释行。

(3) ans 是系统自动给出的，代表 MATLAB 运算后的答案 (Answer)，除了便于区别运算结果外，还可以作变量用。

三、若干通用操作指令

MATLAB 除可以通过菜单对工作窗口进行操作外，也可以通过键盘输入指令进行操作，下面列出一些通用操作指令：

quit：关闭 MATLAB。

clear：清除内存中的变量。

cla：清除坐标。

clf：清除图形。

clc：清除 MATLAB 命令窗口中的所有显示内容。

dir：列出指定目录下的文件和子目录。

cd：改变当前工作目录。

disp：运行时显示变量和文字内容。

type：显示指定文件的内容。

hold：控制当前图形窗口不被删除。

四、快捷键的使用

为了使用方便，我们常用快捷键进行操作。常用的快捷键有：

Page Up：向上翻页。

Page Down：向下翻页。

Ctrl+Home：光标返回页首。

Ctrl+End：光标返回页尾。

Ctrl+C：复制。

Ctrl+V：粘贴。

Ctrl+Q：退出 MATLAB。

↑：显示上一次输入的命令。

↓：显示下一次输入的命令。

←：光标左移。

→：光标右移。

第二节 MATLAB 的基本语法

一、MATLAB 的变量和表达式

(1) 变量命名规则：

① 可以是字母、数字或下划线，但第一个字符必须是字母。

② 长度 ≤ 31 。

③ 分辨大小写的，M 和 m 是两个变量。

④ 无须对变量的类型进行说明，当需要使用一个新变量时，只须直接对其赋值即可。

(2) 表达式则是由运算符、函数调用、变量名以及特殊字符组成的式子。

(3) MATLAB 中基本的赋值语句为：

① 形式一：变量名=表达式

将表达式的结果赋给变量名(表达式的运算结果都是一个矩阵)。

② 形式二：表达式

计算表达式的值，将其值赋给 MATLAB 的永久变量 ans。

上面两种形式，当表达式由分号“;”结束时，变量结果不显示。当表达式由逗号“,”或换行号结束，则将结果显示出来。

注意：

① MATLAB 中有几个变量不能被 clear 清除，称永久变量(其他变量名最好不要与此相同)。即

ans：当不指明某一语句的计算结果赋给哪个变量时，系统自动将该计算结果赋给 ans；

eps：计算机能产生的绝对值最小的浮点数；

i, j：虚数单位，即-1的平方根；

inf, Inf：正无穷大；

nan, NaN：非数，常产生于0/0等运算；

pi：圆周率。

② 如果表达式的值太复杂，一行写不下，可以加上“...”回车，然后接下去再写。如：

sum=1+2+3+4+5+6+7+8+9+10+11+12+13+14+15+16+17+18+19+20...

(4) 字符串与字符串变量：

MATLAB 可将字符串当作数组或矩阵处理。在 MATLAB 中，字符串用单引号括起来，如：

例 R='computer'

输出结果是： R=computer

字符串存储在行向量中，每个元素对应一个字符，向量的值为字符对应的 ASCII 码值。

二、矩阵

1. 在 MATLAB 中创建矩阵的原则

(1) 矩阵元素必须写在“[]”内；

(2) 矩阵的同一行之间用空格或“,”分隔；

(3) 矩阵的行与行之间用分号或回车符分隔；

(4) 矩阵的尺寸不必预先定义；

(5) 矩阵元素可以是数值、变量、表达式或函数。

2. 创建矩阵的四种方法

(1) 在命令窗口直接输入:

如输入: $A=[1, 2, 3; 4, 5, 6; 7, 8, 9]$ 则显示: $A =$

1 2 3

4 5 6

7 8 9

也可用空格代替逗号, 用回车代替分号:

如上例: $A=[1 \ 2 \ 3$

4 5 6

7 8 9]

则显示: $A=1 \ 2 \ 3$

4 5 6

7 8 9

(2) 由 M 文件创建矩阵:

有时编程需要用 M 文件创建矩阵。或者当矩阵尺寸较大时, 可以按矩阵的输入方式编辑一个 M 文件(可用循环程序来做), 在命令窗口直接执行该文件, 即可将矩阵调入工作空间。

(3) 由函数创建矩阵:

对于一些特殊的矩阵, 可以利用 MATLAB 的内部函数或用户自定义函数创建矩阵。

如 `diag()` 函数可生成对角阵。

(4) 通过数据文件创建矩阵:

`save` 文件名 (其中, 文件名是 *.mat 文件)`load` 文件名 例: 工作目录下有 `asdf.mat` 文件, 可以执行 `load asdf`

3. 复数矩阵表示

(1) 复数表示:

复数的虚根单位用 i, j 表示, 即: $z=3+4i$ 或 $z=3+4j$ 。例如 输入 $z=3+4i$ 输入 $z=3+4j$

得到:

 $z=3.0000+4.0000i$

得到:

 $z=3.0000+4.0000j$

(2) 复数矩阵:

 $A=[1 \ 2; 3 \ 4]+i*[5 \ 6; 7 \ 8]$ 或者 $A=[1+5i \ 2+6i; 3+7i \ 4+8i]$, 都得到: $A=1.0000+5.0000i \ 2.0000+6.0000i$ $3.0000+7.0000i \ 4.0000+8.0000i$

4. 向量

向量是 $1 \times N$ 的特殊矩阵, 即只有一行或者一列, 称为 N 维向量。

5. 向量的点积与叉积

点积: `dot(A, B)`

叉积: `cross(A, B)`

三、MATLAB 的初等运算

(1) 矩阵运算符:

A' ——矩阵 A 的转置, 如果 A 是复矩阵, 则其运算结果是共轭转置;

$A+B$ ——矩阵的加运算,

$A-B$ ——矩阵的减运算,

$A * B$ ——矩阵相乘, A 的列数与 B 的行数相等, 即 A 和 B 矩阵维数相容, 维数不相容是不可乘的。

B/A ——方程 $X * A = B$ 的解, 即 $X = B * A^{-1}$ 。称矩阵的右除。

$A \setminus B$ ——方程 $A * X = B$ 的解, 即 $X = A^{-1} * B$ 。称矩阵的左除。

矩阵的除法, 其意义相当于矩阵的求逆运算。左除与右除的关系为: $b/a = (a' \setminus b')'$ 。

A^B ——矩阵的乘方。

$A . * B$ ——矩阵的点乘运算, 表示 A 和 B 阵的对应元素直接相乘, A 和 B 要有相同的维数。

点运算在 MATLAB 中起重要的作用, 如 X 是一个向量, 则求取 X^2 时不能直接写成 $X * X$, 而必须写成 $X . * X$ 。

$A . \setminus B$, $A ./B$ ——矩阵的点除运算, 表示 A 和 B 阵的对应元素直接相除, A 和 B 要有相同的维数。

$A.^B$ ——矩阵的点乘方, 表示要对其元素逐一进行幂运算。

(2) 关系运算符:

MATLAB 中提供了 6 种关系运算符, 用于比较两个同维数的矩阵:

< 小于 <= 小于或等于

> 大于 >= 大于或等于

== 等于 ~= 不等于

关系运算符可以用于检查矩阵的元素是否满足某些条件。两个同维数的矩阵比较的结果是与它们同维数的 0、1 矩阵, 1 表示结果为真, 0 表示结果为假。

(3) 逻辑运算符:

在 MATLAB 中, 逻辑运算符有 3 种。

- & 逻辑与。当运算双方对应元素都为非零时; 结果为 1, 否则, 结果为 0。
- | 逻辑或。当运算双方对应元素有一个为非零时; 结果为 1, 否则, 结果为 0。
- ~ 逻辑非。当元素的值为 0 时, 结果为 1, 否则, 结果为 0。

例 1-1 $a = [1 \ 0 \ 3; 0 \ -1 \ 6]$, $b = [-1 \ 0 \ 0; 0 \ 5 \ 0.3]$, 计算两矩阵对应元素的逻辑关系。

>> a&b	>> a b	>> ~a	>> ~b
ans =	ans =	ans =	ans =
1 0 0	1 0 1	0 1 0	0 1 1
0 1 1	0 1 1	1 0 0	1 0 0

(4) 特殊运算符:

在 MATLAB 中, 有一些特殊的符号, 具有特殊的意义。

① 在 MATLAB 的 M 文件中, 可以加入解释行, 解释行的标识符为: “%”, 该符号后面的内容将作为注释内容。

② 行分隔符: “;” 用在 MATLAB 语句后, 用它时执行结果不显示, 可避免显示一些不用的结果。

③ 冒号运算符“:”最主要的作用是生成向量。如:

j:k——生成向量 [j, j+1, j+2, ..., k]

A(:, j)——矩阵 A 的第 j 列

A(i, :)——矩阵 A 的第 i 行

A(j:k)——生成向量 A (A 为向量时, 为 A 的第 j 到第 k 个元素; 当 A 为矩阵时, 为 A 的按列数的第 j 到第 k 个元素)

④ MATLAB 中允许对一个矩阵的单个元素进行赋值, 如:

```
A=1 2 3
```

```
4 5 6
```

```
7 8 9
```

当执行 A(2, 3)=100, 则显示:

```
A=1 2 3
```

```
4 5 100
```

```
7 8 9
```

注意: 矩阵中元素按列存储, 上例中对矩阵元素操作也可这样调用 A(8)=8

对于一个矩阵中 0 元素很多, 而非 0 元素很少的情况, 可以先形成 0 矩阵, 然后将非 0 元素输入。

第三节 MATLAB 程序设计

MATLAB 输入命令的常用方式有两种: 一种是直接在 MATLAB 的命令窗口中逐条输入 MATLAB 命令; 另一种是 M 文件工作方式。当命令行很简单时, 使用逐条输入方式还是比较方便的。但当命令行很多时(比如说几十行乃至成百上千行命令), 显然再使用这种方式输入 MATLAB 命令, 就会显得杂乱无章, 不易于把握程序的具体走向, 并且给程序的修改和维护带来很大的麻烦。这时, 采用 MATLAB 命令的第二种输入形式: M 文件工作方式。

M 文件工作方式, 指的是将要执行的命令全部写在一个文本文件中, 这样既能使程序显得简洁明了, 又便于对程序的修改与维护。M 文件直接采用 MATLAB 命令编写, 就像在 MATLAB

的命令窗口直接输入命令一样，因此调试起来也十分方便，并且增强了程序的交互性。

M 文件与其他文本文件一样，可以在任何文本编辑器中进行编辑、存储、修改和读取。

利用 M 文件还可以根据白己的需要编写一些函数，这些函数也可以像 MATLAB 提供的函数一样进行调用。从某种意义上说，这也是对 MATLAB 的二次开发。

M 文件有两种形式：一种是命令方式或称脚本方式；另一种就是函数文件形式。两种形式的文件扩展名均是 .m。

一、M 文件

当遇到输入命令较多以及需要重复输入命令的情况时，利用命令文件就显得很方便了。将所有要执行的命令按顺序放到一个扩展名为 .m 的文本文件中，每次运行时只需在 MATLAB 的命令窗口输入 M 文件的文件名就可以了。需要注意的是，M 文件最好直接放在 MATLAB 的默认搜索路径下（一般是 MATLAB 安装目录的子目录 work 中），这样就不用设置 M 文件的路径了，否则应当用路径操作指令 path 重新设置路径。另外，M 文件名不应该与 MATLAB 的内置函数名以及工具箱中的函数重名，以免发生执行错误命令的现象。MATLAB 对命令文件的执行等价于从命令窗口中顺序执行文件中的所有指令。命令文件可以访问 MATLAB 工作空间里的任何变量及数据。命令文件运行过程中产生的所有变量都等价于从 MATLAB 工作空间中创建这些变量。因此，任何其他命令文件和函数都可以自由地访问这些变量。这些变量一旦产生就一直保存在内存中，只有对它们重新赋值，它们的原有值才会变化。关机后，这些变量也就全部消失了。另外，在命令窗口中运行 clear 命令，也可以把这些变量从工作空间中删去。当然，在 MATLAB 的工作空间窗口中也可以用鼠标选择想要删除的变量，从而将这些变量从工作空间中删除。

接下来，编写一个名为 test.m 的命令文件，用来计算矩阵 1 到 100 的和，并把它放到变量 s 中。

第一步 创建新的 M 文件（如图 1-3）。在 MATLAB 主菜单上选择菜单命令 File→New→M-File。

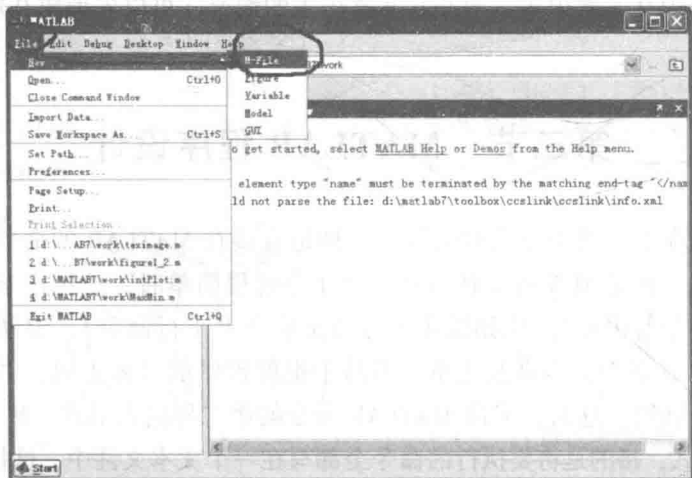


图 1-3 创建新的 M 文件

第二步 编写代码。在接下来出现的编辑框中输入相应的代码，见图 1-4。

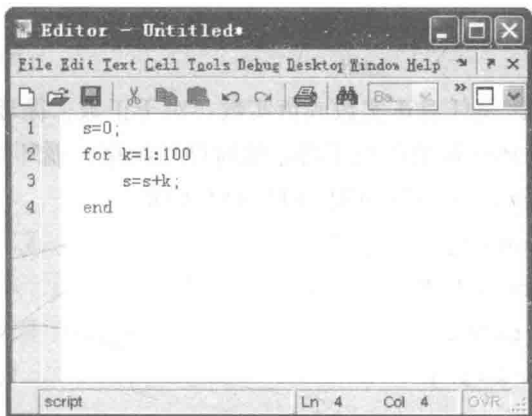


图 1-4 代码编辑框

第三步 保存。利用编辑框中的菜单命令 File→Save，或者直接点击其上的图标, 就弹出一个保存文件的对话框(如图 1-5)。



图 1-5 保存文件

将文件名中的 Untitled.m 改成 test，点击“保存”按钮。

第四步 M 文件的使用。回到 MATLAB 的主界面，在命令窗口输入如下两条命令：

```
>>test
```

```
>>s
```

观察结果。

二、MATLAB 程序流程控制

MATLAB 语言的程序结构与其他高级语言是一致的，分为顺序结构、循环结构、分支结构。

(1) 顺序结构——依次顺序执行程序的各条语句。

(2) 循环结构——被重复执行的一组语句，循环是计算机解决问题的主要手段。

循环语句主要有：

① for—end

语法为: for 循环变量=起始值:步长:终止值

循环体

end

步长缺省值为 1, 可以是任意正实数或负实数。对于正数, 循环变量的值大于终止值时循环结束; 对于负数, 循环变量的值小于终止值时循环结束。循环结构可以嵌套使用。

例 1-2 利用 for 循环求 $1! + 2! + 3! + 4! + 5!$ 的值

```
sum=0;
for i=1: 5
    pdr=1;
    for k=1: i
        pdr=pdr* k;
    end
    sum=sum+pdr;
end
sum
```

② while—end 循环

语法为: while 表达式

循环体

end

若表达式为真, 则执行循环体的内容, 执行后再判断表达式是否为真; 若不为真, 则跳出循环体, 向下继续执行。

While 循环和 for 循环的区别在于, while 循环结构的循环体被执行的次数不是确定的, 而 for 结构中循环体的执行次数是确定的。

例 1-3 用 while 循环求 1~100 间整数的和。

```
sum=0;
i=1;
while i<= 100
    sum=sum+i;
    i=i+1;
end
sum
```

(3) 分支结构—根据一定条件来执行的各条语句。

if—else—end 语句有 3 种形式

① if 表达式

执行语句

end

② if 表达式 —— 是


```

        语句 1
    else —— 否
        语句 2
    end
③ if 表达式 1 —— 多分支
        语句 1
    elseif 表达式 2
        语句 2
    elseif 表达式 3
        语句 3
        .
        .
        .
    else
        语句 n
    end

```

这种结构实现了一种多路选择，比较复杂。可替代一般高级语言中的 switch-case-end 语句。

例 1-4 将百分制的成绩转换为五级制的成绩输出。

程序如下：

```

clear
n=input(' 输入 n= ');
if n>=90
    r=' A'
elseif n>=80
    r=' B'
elseif n>=70
    r=' C'
elseif n>=60
    r=' D'
else
    r=' E'
end
运行结果：
输入 n=87
r=

```